

AKADEMIE FÜR LEHRENTWICKLUNG VIRTUAL CHEMISTRY

FÖRDERLINIE: INNOVATION IN DER LEHRE

Prof. Dr. Stefanie Gräfe – Institut für Physikalische Chemie

MOTIVATION

In diesem Projekt sollen Konzepte der **virtuellen Realität** in die **Chemieausbildung** in Haupt- und Nebenfach eingebracht werden. Für viele Konzepte in der Chemie, wie bspw. Reaktionsmechanismen, Molekülorbitale, aber auch komplexere Reaktionen wie das „Andocken“ eines Substratmoleküls an ein aktives Zentrum eines Enzyms, ist eine gute 3D Vorstellung des Systems für das Verständnis von immenser Bedeutung.

In der „klassischen“ Lehre wird hierzu typischerweise auf 2D Projektionen (Tafel- bzw. Formelbild,) zurückgegriffen, oder aber sogenannte Molekülbaukästen verwendet, mit Hilfe derer aus Kugeln und Verbindungsstücken kleinere Moleküle zusammen „gesteckt“ werden können. Ein derartig zusammengestecktes Molekül kann gedreht und gewendet werden, was den Studierenden dabei hilft, eine 3D Vorstellung zu erhalten. Jedoch stößt dieser Ansatz bei größeren Systemen und Molekülen intrinsisch an seine Grenzen.

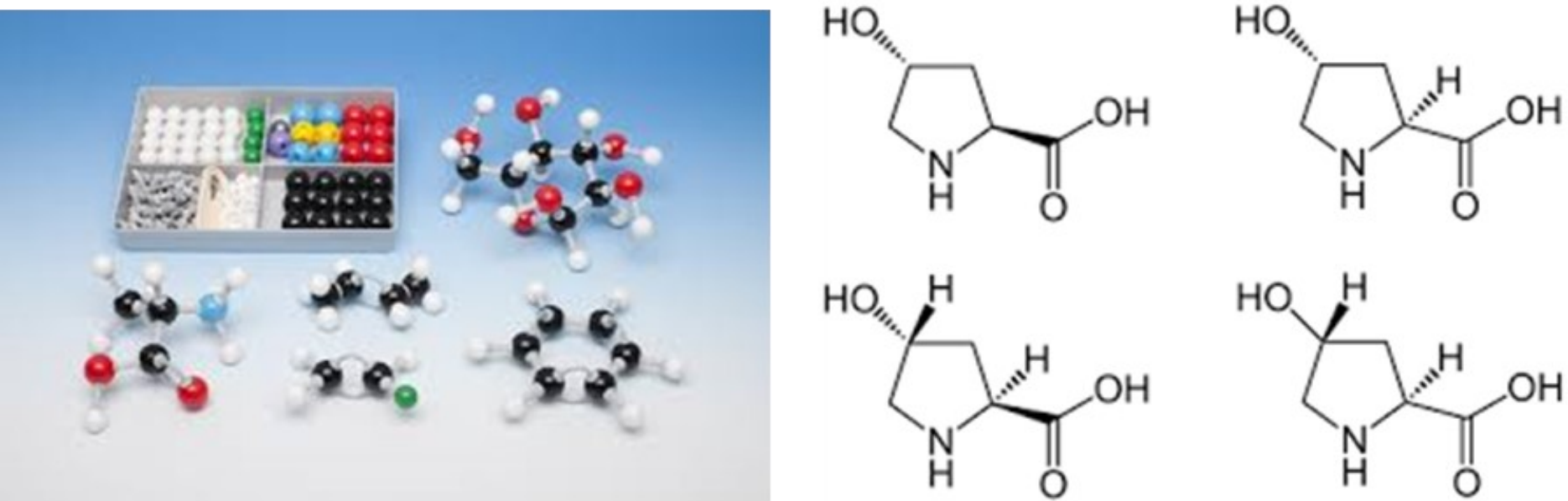


Bild 1 links: Molekülbaukasten, hier ein Bild des sogenannten „MOLYMOB“ Modells, Bild entnommen der Webseite des Betreibers, winlab.de; rechts: Strukturformel: die Keile deuten an, ob ein Atom bzw. Atomgruppe in die Ebene hinein (gestrichelte Form) oder aus der Ebene heraus (gefüllte Form) zeigt. Abbildung aus Wikipedia.

ZIELSTELLUNG

Im Rahmen dieses Projekts sollen daher moderne technische Ansätze zur Visualisierung eingesetzt werden, um Studierende dabei zu unterstützen, das räumliche Vorstellungsvermögen zu schulen, eine 3D-Vorstellung der Moleküle und damit ein besseres Verständnis zu entwickeln. Wir verfolgen dabei zwei unterschiedliche Ansätze: (1) das **(inter)aktive „Erleben“** der 3D-Umgebung durch **virtuelle und augmentierte Realität (VR und AR)**. (2) Das **„Be“-Greifen** größerer Moleküle und Systeme durch plastische Formen, die über einen **3D-Drucker** erstellt wurden.

Ziel ist es, diese Werkzeuge im Rahmen bereits existierender Praktika in den Fächern Theoretische und Computergestützte Chemie zunächst in einigen Prototyp-Versuchen einzubringen. Bei Erfolg beabsichtigen wir, in Zusammenarbeit mit den weiteren Kollegen der Fakultät, diese Werkzeuge auch in weiteren Fächern bzw. Veranstaltungen zu erproben. Konkret sieht das Konzept für die Anfangsphase aus, wie im Folgenden erläutert.

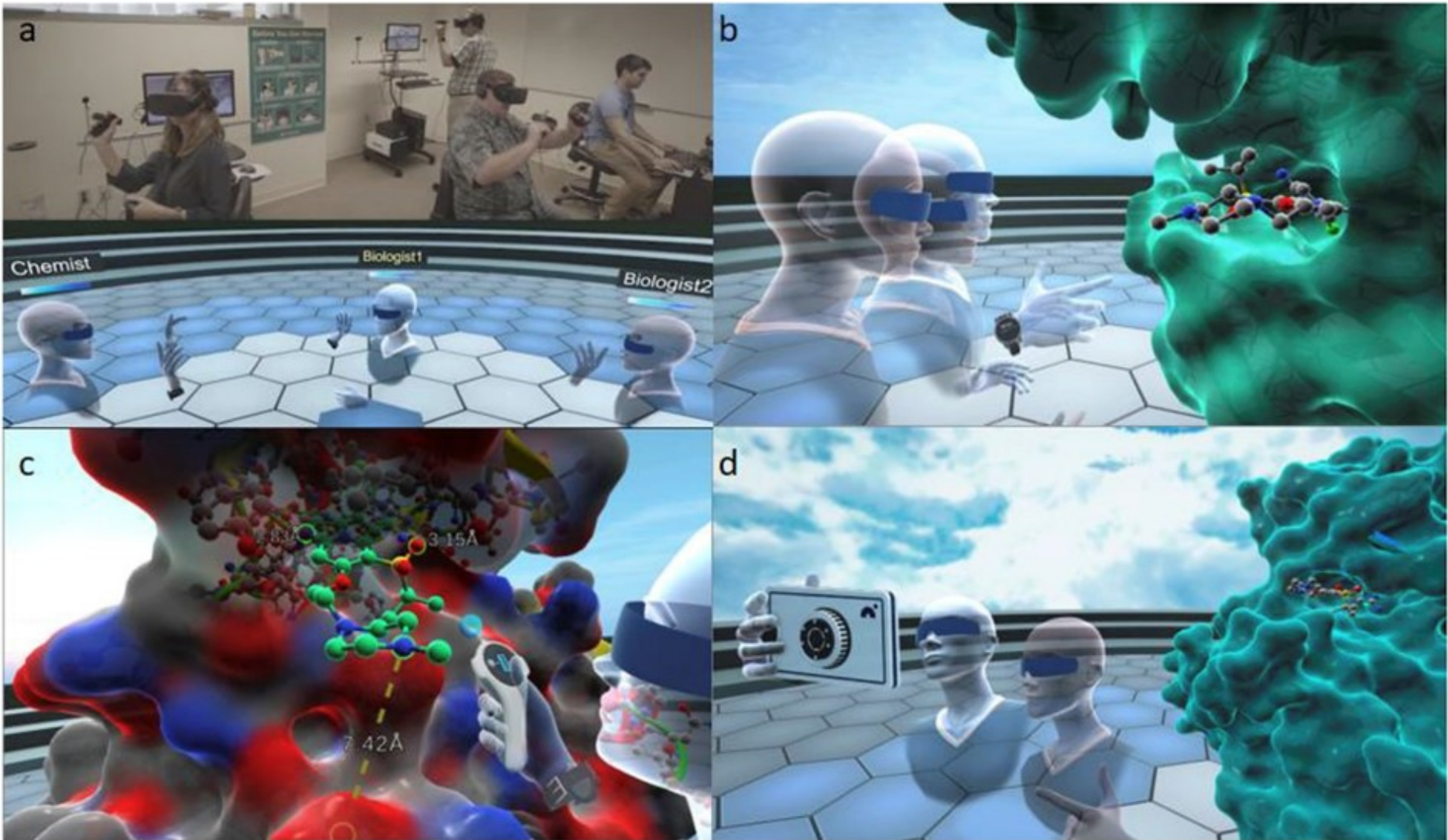


Bild 2
Einsatz einer VR-Brille in der Chemie-Ausbildung. Bild von Referenz [3].

Prof. Dr. Stefanie Gräfe
Institut für Physikalische Chemie
E-Mail: s.graefe@uni-jena.de
Kontakt: Barbara Kirchner, barbara.kirchner@uni-jena.de

UMSETZUNG

Die 3D Visualisierung soll, leicht abweichend vom ursprünglichen Projektplan, nicht mehr nur den Einsatz von **VR-Brillen** und **3D-Drucker** beinhalten, sondern wird zusätzlich – speziell vor dem besonderen Hintergrund der Corona-Situation und den damit verbundenen Herausforderungen an die Lehre (mit eigenen Mitteln) über eine **Augmented Reality (AR) Handy-App** unterstützt.

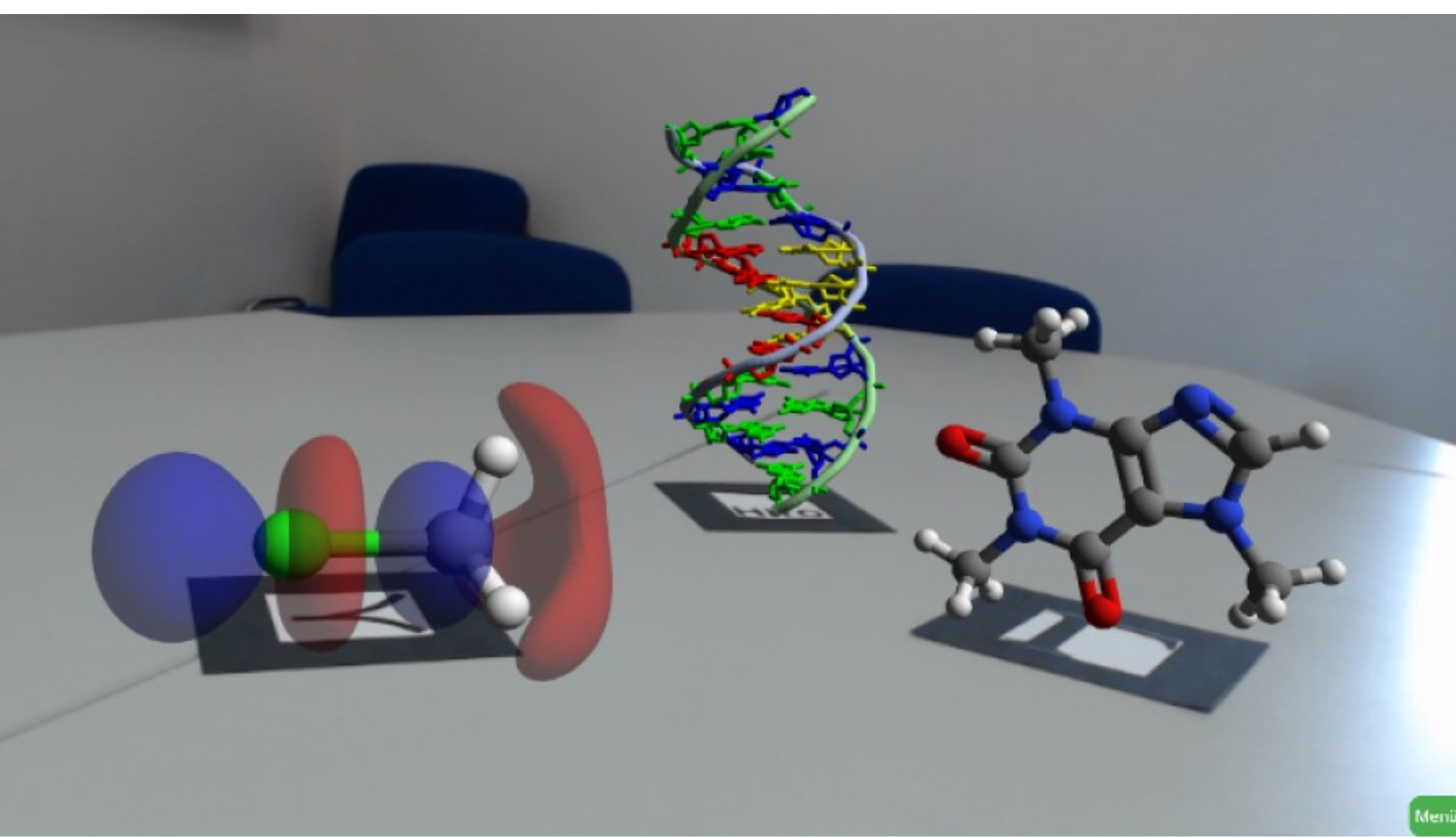


Bild 3 Einige Beispiele für Augmented Reality Visualisierung. Bild: Sebastian Habig (Univ Duisburg-Essen): https://hochschulforumdigitalisierung.de/de/blog/arc-augmented-reality-chemistry

Um diese FSU Jena **AR Handy App** zeitnah, idealerweise schon im WS 2020/21 verfügbar zu haben (Hintergrund Online-Lehre durch CoViD-19), haben wir einen externen Dienstleister (*Institut für Angewandte Informatik, Leipzig*) beauftragt, entsprechende native Schnittstellen auf den Mobilgeräten (iOS + Android) zu entwickeln. (→ *open source*!)

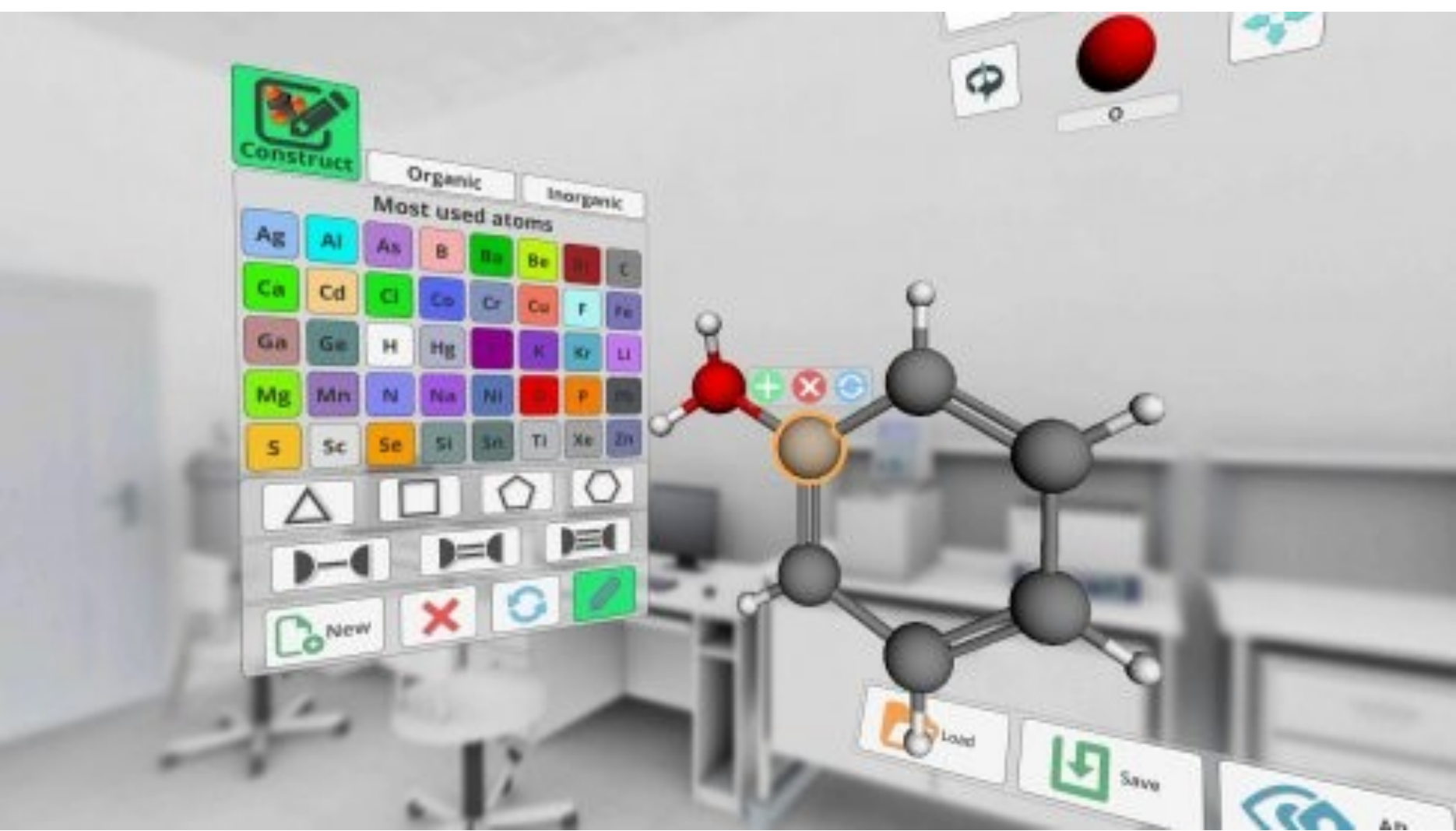


Bild 4 AR VR Molecules Editor (Bild von der gleichnamigen Webseite: https://www.androidfreeware.net/download-ar-vr-molecules-editor.html)

Es gibt bereits einige Chemie-orientierte AR-Apps, jedoch liegt unser Fokus nicht nur auf der Visualisierung, sondern wir wünschen die Möglichkeit, eigene quantenchemische bzw. molekulardynamische Simulationen, Praktikumsversuche und auf unsere Bedürfnisse zugeschnittene Formate z.B. in der Spektroskopie ablaufen zu lassen (modular).

Des Weiteren soll eine einfache Übertragbarkeit auf Virtual Reality Brillen in einer zweiten Phase (Sommersemester) gegeben sein.

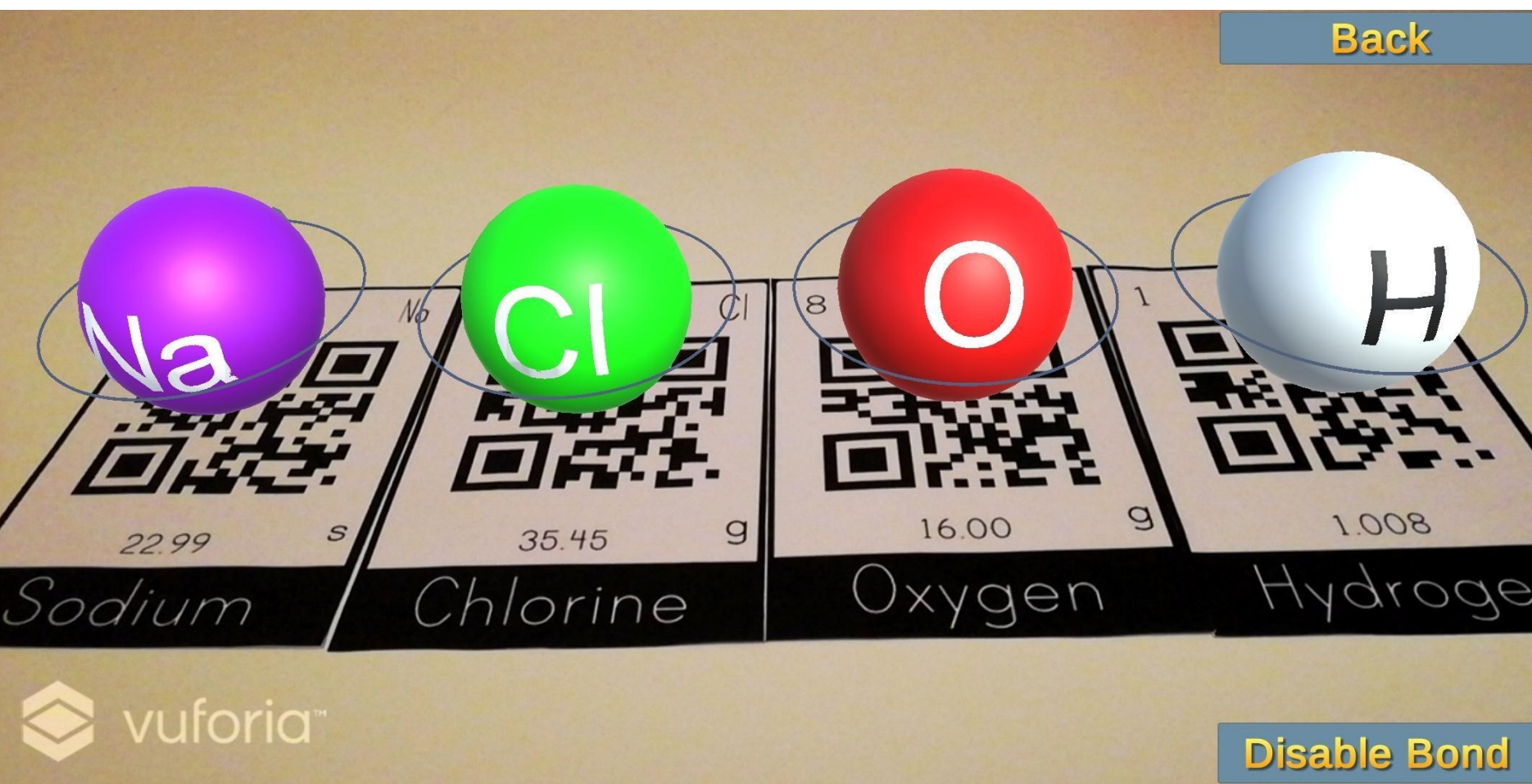


Bild 5 Chemistry Simulator AR (Bild von der gleichnamigen Webseite: https://apkpure.com/chemistry-simulator-ar/com.ReptileSoft.ChemistryAR)

[1] <https://www.chemistryworld.com/news/virtually-chemistry/3008119.article>; <https://phys.org/news/2018-07-virtual-reality-chemistry-d.html>; <https://www.nature.com/articles/d41586-018-05574-3>
[2] M. O'Connor, et al., „Sampling molecular conformations and dynamics in a multiuser virtual reality framework“, Science Advances 2018, eaat2731.
[3] L. J. Kingsley, et al., „Development of a virtual reality platform for effective communication of structural data in drug discovery“, Journal of Molecular Graphics and Modelling 89, 234-241 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2019.03.010>.

Zielgruppe 1:

Hauptfach Chemie und Lehramt Chemie

Vorlesung *Physikalische Chemie*– Spektroskopie und Quantenchemie: Visualisierung von Atom- und Molekülorbitalen und Verbindung zum optischen Anregungsspektrum

Visualisierung von Schwingungen und zugehöriges Schwingungsspektrum

Wahlpflichtfach *Theoretische Chemie/Computerchemie*: Visualisierung kleiner chemischer Reaktionen

Vorlesung *anorganische Chemie*–Komplexchemie: 3D Struktur

Vorlesung *organische Chemie*–Reaktionsmechanismen, chirale Moleküle

Vorlesungen für das Lehramt, in Absprache mit Prof. Wilke (Chemie Didaktik)

Zielgruppe 2:

Interdisziplinäre (Master-)Studiengänge

Vorlesung *Medical Photonics*: Visualisierung enzymatischer Reaktionen: Enzym, Bindungstasche und aktives Zentrum (→ später ggf. Übertragung auf Studiengänge Biochemie)

Vorlesung im Rahmen des Master Chemistry of Materials: *Multiscale Simulation and Computational Science* und *Advanced Simulation Methods*: Visualisierung materialwissenschaftlicher Aspekte: Oberflächenbeschaffenheit, heterogene Katalyse

Ausdehnung auf weitere Fächer: Biochemie, Geologie und Geographie (Visualisierung von Landschaften/ Bodenbeschaffenheit, ...)

SEKUNDÄRE EFFEKTE

Außendarstellung:

Moderne Lernkonzepte über FSU Jena **Augmented Reality App** und **Virtual Reality Brillen**.

Einsatz auch z.B. im Rahmen des MINT-Festivals, GirlsDay oder Lange Nacht der Wissenschaft denkbar

ZUSAMMENFASSUNG

Räumliche Visualisierung mit dem Fokus auf Physikalischen und Chemische Fragestellungen:

- Entwicklung einer quelloffenen FSU Jena Chemie **Augmented Reality App** mit eigens definierten Lerninhalten (Spektroskopie, Quantenchemie, ...)
- Einrichtung eines **Virtual Reality Labors** (Verwendung zunächst für Studierende der Chemie und Physik)
- Entwicklung und Einspielung eigens definierter Lerninhalte

Nach Pilotphase mit einigen wenigen ausgewählten Lerninhalten und Versuchen kann eine mögliche Erweiterung auf andere Vorlesungen und Fächer erfolgen.



FRIEDRICH-SCHILLER-
UNIVERSITÄT
JENA